3.3 파동함수의 표현 - 위치 표현과 운동량 표현

• **힐베르트 공간과 파동함수의 전개**

앞 절에서 우리는 임의의 파동함수 $\Psi(x)$ 를 고유함수들 $\{\ \psi_n(x)\ \}$으로 전개하였다. 이를 디락 브라-켓으로 표현하면, $|\Psi> \ = \sum_{n=1}^{\infty} a_n\ |\psi_n> \ = \sum_{n=1}^{\infty} |\psi_n><\psi_n|\Psi>$ 로 쓸 수 있다. 그러므로 우리는 $\sum_n |\psi_n><\psi_n| \ = 1$ 이 됨을 알 수 있다. 즉, 모든 고유함수의 켓-브라에 대한 전체적인 합은 항등연산자(identity operator) 1 과 같다. 항등연산자라 함은 어떤 상태벡터에도 변화를 주지 않는 연산자를 뜻한다.

이와 같이 힐베르트 공간에 존재하는 임의의 상태벡터(state vector)를 특정한 벡터들로 전개할 수 있을 때 우리는 이 벡터들이 완전집합(complete set)을 이루었다고 하며 기저벡터들(basis vectors)이라고 부른다. 위에서는 $\{\ |\psi_n>\ \}$들이 이에 해당한다. 이때 우리는 기저벡터들인 고유벡터들의 집합$\{\ |\psi_n>\ \}$이 힐베르트 공간을 생성한다(span)고 말한다. 이는 마치 임의의 3차원 벡터 $|A>$ 를 x, y, z 방향의 단위벡터들$\{\ |i>,\ |j>,\ |k>\ \}$로 언제나 표현할 수 있는 것과 같다.

$$\begin{aligned} |A> \ &= \ |i><i|A> \ + \ |j><j|A> \ + \ |k><k|A> \\ &= \ |i>A_x + \ |j>A_y + \ |k>A_z \end{aligned}$$

이 경우, 단위벡터들$\{\ |i>,\ |j>,\ |k>\ \}$은 기저벡터들로서 3차원 벡터공간을 생성한다.

양자역학적인 상태벡터들의 공간이 속해 있는 힐베르트 공간은 벡터공간으로서 다음과 같은 특성을 가진다.

1) 힐베르트 공간은 선형이다:
  $|\phi>,\ |\psi>$ 가 힐베르트 공간에 속하면 $|\phi> \ + \ |\psi>$ 도 힐베르트 공간에 속한다.

2) 힐베르트 공간에는 내적이 존재한다.
 즉, 임의의 두 벡터 $|\phi>,\ |\psi>$ 사이의 내적을 정의할 수 있다: $<\phi|\psi> \ \in \mathbb{C}$

3) 벡터의 크기(norm)은 내적으로 정의된다: $\|\phi\| \ = \ <\phi|\phi>$.

4) 힐베르트 공간은 완전하다(complete).
  힐베르트 공간에 속하는 함수들의 모든 코시 수열(Cauchy sequence)은 힐베르트 공간의 원소로 수렴한다. 즉, 힐베르트 공간은 이 수열들의 모든 극한들을 포함한다.
  여기서 코시 수열$\{\phi_n\}$은 $\lim_{n,m\to\infty} \|\phi_n - \phi_m\| \to 0$ 이 되는 수열이다.

양자역학에서 흔히 요구되는 모든 상태벡터들의 크기(norm)가 유한하다는 조건을 만족하는 힐베르트 공간을 "L^2 공간"이라고 부르는데, 이는 전 영역에서 제곱-적분 가능한(square integrable) 함수들로 이루어진 벡터 공간을 의미한다.

$$\|\phi\| \ = \ <\phi|\phi> \ = \ \int_{-\infty}^{\infty} dx\ \ |\phi(x)|^{2} \ < \ \infty \ .$$

• **위치 표현**

위치 연산자의 고유상태를 켓-벡터 $|\,x>$ 로 표현하면, 우리는 이를 위치 연산자를 $\hat{x}$ 를 가지고 다음과 같이 표현할 수 있다: $\hat{x}\,|\,x> \,= x\,|\,x>$. 즉, 켓-벡터 $|\,x>$ 는 고유값이 x로 주어지는 위치 연산자의 고유상태이다. 이는 입자의 위치가 x인 상태를 의미한다. (여기서 우리는 위치 측정치에 해당하는 고유값인 스칼라 양 x와 연산자로서 위치 연산자 $\hat{x}$를 혼동하지 않도록 서로 구분하여 표시하였다.) 이제 앞에서처럼 고유벡터들 $\{\,|\,x>\,\}$은 완전집합을 이루므로 $\int_{-\infty}^{\infty} dx\,|\,x><x\,| \,= 1$ 이 되고, 임의의 상태벡터 $|\,\Psi>$ 는 다음과 같이 쓸 수 있다.

$$|\,\Psi> \,= \int_{-\infty}^{\infty} dx\,|\,x><x\,|\,\Psi>$$

여기서는 위치의 고유값 x가 연속적인 값을 가지고 모든 영역에 걸쳐있으므로 합 대신에 적분을 사용하였다. 앞의 경우와 비교하면, 내적 $<x\,|\,\Psi>$ 는 위치 고유벡터 $|\,x>$ 에 대한 상태벡터 $|\,\Psi>$ 의 전개계수에 해당한다. 이 전개계수가 연속적인 x 값에 의존하므로 우리는 이를 파동함수(wave function)라고 부르며 $\Psi(x)$ 로 표시한다.

$$<x\,|\,\Psi> \,:= \Psi(x)\ .$$

여기서 상태벡터 $|\,\Psi>$ 가 위치의 고유벡터들$\{\,|\,x>\,\}$로 표현되었으므로 우리는 이러한 상태벡터 표현을 위치 표현(position representation)이라고 부른다.

$$|\,\Psi> \,= \int_{-\infty}^{\infty} dx\,|\,x>\,\Psi(x)\ .$$

• **운동량 표현**

위에서와 마찬가지로 우리는 동일한 상태벡터 $|\,\Psi>$ 를 운동량의 고유벡터들로도 표현할 수 있는데 이를 운동량 표현(momentum representation)이라고 한다.
이를 위해서 먼저 운동량 연산자 $\hat{p}$ 의 고유벡터 $|\,p>$ 를 생각한다: $\hat{p}\,|\,p> \,= p\,|\,p>$.
여기서 p 는 운동량의 고유값으로 전체영역에 걸쳐 연속적인 값을 갖는다.

다시 운동량 고유벡터들$\{\,|\,p>\,\}$은 완전집합을 이루므로 $\int_{-\infty}^{\infty} dp\,|\,p><p\,| \,= 1$ 이 되고, 상태벡터 $|\,\Psi>$ 는 다음과 같이 표현할 수 있다.

$$|\,\Psi> \,= \int_{-\infty}^{\infty} dp\,|\,p><p\,|\,\Psi>$$

이때 전개계수 $<p\,|\,\Psi>$ 를 운동량 표현에서의 파동함수라고 한다: $<p\,|\,\Psi> \,:= \Phi(p)$.
여기서 $\Psi(p)$ 로 써야 더 적절할 것 같으나 실제는 함수가 $\Psi(x)$ 와 다르므로 위치 표현에서의 파동함수와 구분하기 위하여 $\Phi(p)$ 로 표시하였음을 이해하기 바란다.

즉, $|\,\Psi> \,= \int_{-\infty}^{\infty} dp\,|\,p>\,\Phi(p)\ .$

그렇다면 운동량 고유벡터의 위치 표현 함수는 어떻게 주어질까? 위에서의 표현에 따르면 이는 $< x \mid p >$ 로 기술될 것이며 우리는 이를 $< x \mid p > \; \equiv u_p(x)$ 로 표현하겠다. 이는 위치 x 의 함수로 표시된 운동량 연산자의 고유벡터이므로 다음 관계식을 만족한다.

$$\hat{p}\, u_p(x) = p\, u_p(x)$$

여기서 운동량 연산자를 x에 대한 연산자로 표현하면 위식은 다음과 같다.

$$\frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}\, u_p(x) = p\, u_p\,(x)$$

이 미분방정식의 해는 $u_p(x) = N\exp\,(\frac{i}{\hbar}p\,x)$ 이고, N은 규격화 상수이다.

연속적인 고유함수의 규격화는 디락 델타함수로 정의하므로,

$$< p' \mid p > \; = \int_{-\infty}^{\infty} dx < p' \mid x >< x \mid p >= \int_{-\infty}^{\infty} dx\, N^{*} \exp\,(-\frac{i}{\hbar}p'x)\, N\exp\,(\frac{i}{\hbar}p\,x) = \delta\,(p-p'),$$

이를 만족하기 위해서는 $N = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}$ 가 되어야 한다: $u_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\,\exp\,(\frac{i}{\hbar}p\,x)$.

• 위치 표현과 운동량 표현 사이의 관계

위치 표현에서의 파동함수 $\Psi(x)$ 와 운동량 표현에서의 파동함수 $\Phi(p)$ 는 어떠한 관계에 있을까? 이는 $\Psi(x)$ 를 다음과 같이 표현하면 쉽게 볼 수 있다:

$$\Psi(x) = \; < x \mid \Psi > \; = \; \int_{-\infty}^{\infty} dp \;\; < x \mid p >< p \mid \Psi > \; = \int_{-\infty}^{\infty} dp\, u_p(x)\Phi(p)$$

즉, $\Psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{\infty} dp\,\exp\,(\frac{i}{\hbar}p\,x)\Phi(p)$ 로 주어진다. 한편 운동량 표현 파동함수 $\Phi(p)$ 는 다음과 같이 표현된다.

$$\Phi(p) = \; < p \mid \Psi > \; = \; \int_{-\infty}^{\infty} dx \;\; < p \mid x >< x \mid \Psi > \; = \int_{-\infty}^{\infty} dx\, u_p{}^{*}(x)\Psi(x)$$

즉, $\Phi(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{\infty} dx\,\exp\,(-\frac{i}{\hbar}p\,x)\Psi(x)$ 로 주어진다. 이로부터 우리는 위치 표현 파동함수 $\Psi(x)$ 와 운동량 표현 파동함수 $\Phi(p)$ 는 서로 각각 푸리에 변환(Fourier transformation)과 역 푸리에 변환(inverse Fourier transformation)의 관계에 있음을 알 수 있다.

앞에서 우리는 위치 표현에서의 고유벡터 $\mid x >$ 가 고유값이 x로 주어지는 위치 연산자의 고유상태를 표시하며, 이는 입자의 위치가 x인 상태를 의미한다고 하였다. 그런데 이 고유벡터의 위치 표현은 구하지 않았다. 이제까지의 논리에 따르면 두 고유벡터 $\mid x >$ 와 $\mid x' >$ 의 내적은 디락 델타함수로 주어져야 한다. 즉, $< x \mid x' > \; = \delta(x-x')$ 이다. 그런데 이는 또한 위치 고유벡터 $\mid x' >$ 의 (위치 표현에서의) 파동함수 이기도 하다. (예컨대, 파동함수의 위치표현이 $< x \mid \Psi > \; = \Psi(x)$ 로 주어졌음을 기억하자.) 즉, 입자가 x' 에 위치하는 고유상태 $\mid x' >$ 의 파동함수 표현은 디락 델타함수 $\delta(x-x')$ 로 주어진다고 할 수 있다.

이상을 지금까지의 논리에 대입하여 앞에서 구했던 운동량 고유벡터 $|\,p>$ 의 위치 표현인 $<x\,|\,p>$ 와 비교해 보자. 먼저 위에서 $<x\,|\,p>\; = u_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\exp(\frac{i}{\hbar}p\,x)$ 로 주어졌는데, 위치 고유벡터들 $\{\,|\,x>\,\}$의 완전성(completeness), 즉 $\int_{-\infty}^{\infty}dx\;|\,x><x\,|\;=1$을 써서 약간 다르게 표현해 보면 다음과 같이 쓸 수 있다.

$$<x\,|\,p>\; = \int_{-\infty}^{\infty}dx'<x\,|\,x'><x'\,|\,p> = \int_{-\infty}^{\infty}dx'\;\delta(x-x')\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\exp(\frac{i}{\hbar}p\,x')$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\exp(\frac{i}{\hbar}p\,x) = u_p(x)\,.$$

이는 위치 고유벡터의 위치 표현, $<x\,|\,x'>\; = \delta(x-x')$ 가 운동량 고유벡터의 위치 표현과 모순이 없음을 보여준다.

우리는 운동량 연산자의 위치표현이 $\hat{p} = \frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}$ 로 주어짐을 잘 알고 있다. 그런데 위치 연산자 $\hat{x}$의 위치 표현과 운동량 표현은 어떻게 주어질까? 우선 $\hat{x}$의 기댓값을 보면,

$$<\hat{x}>_\Psi\; = \;<\Psi\,|\,\hat{x}\,|\,\Psi>\; = \int_{-\infty}^{\infty}dx\int_{-\infty}^{\infty}dx'\;<\Psi\,|\,x><x\,|\,\hat{x}\,|\,x'><x'\,|\,\Psi>$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty}dx\int_{-\infty}^{\infty}dx'\,\Psi^*(x)x'\delta(x-x')\Psi(x) = \int_{-\infty}^{\infty}dx\Psi^*(x)\,x\,\Psi(x)$$

이 된다. 참고로 여기서 우리는 $\hat{x}\,|\,x>\; = x\,|\,x>$ 라는 고유벡터 관계식을 사용하였다. 위 결과를 기댓값의 정의 $<\hat{x}>_\Psi := \int_{-\infty}^{\infty}dx\Psi^*(x)\,\hat{x}\,\Psi(x)$ 와 비교하면 위치 표현에서의 위치 연산자 $\hat{x}$는 위치의 고유값에 해당하는 변수 x 로 주어짐을 알 수 있다($\hat{x}\to x$).

한편, 이 기댓값의 운동량 표현은 다음과 같이도 쓸 수 있다.

$$<\hat{x}>_\Psi\; = \;<\Psi\,|\,\hat{x}\,|\,\Psi>\; = \int_{-\infty}^{\infty}dp\int_{-\infty}^{\infty}dp'\;<\Psi\,|\,p><p\,|\,\hat{x}\,|\,p'><p'\,|\,\Psi>$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty}dp\int_{-\infty}^{\infty}dp'\;\Phi^*(p)\int_{-\infty}^{\infty}dx\int_{-\infty}^{\infty}dx'<p\,|\,x><x\,|\,\hat{x}\,|\,x'><x'\,|\,p'>\Phi(p')$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty}dp\int_{-\infty}^{\infty}dp'\;\Phi^*(p)\int_{-\infty}^{\infty}dx\int_{-\infty}^{\infty}dx'\;\frac{1}{2\pi\hbar}\exp(-\frac{i}{\hbar}px)\,x'\,\delta(x-x')\,\exp(\frac{i}{\hbar}p'\,x')\,\Phi(p')$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty}dp\int_{-\infty}^{\infty}dp'\;\Phi^*(p)\int_{-\infty}^{\infty}dx\;\frac{1}{2\pi\hbar}\exp(-\frac{i}{\hbar}px)\int_{-\infty}^{\infty}dx'\,\delta(x-x')[\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial p'}\;\exp(\frac{i}{\hbar}p'\,x')]\,\Phi(p')$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty}dp\int_{-\infty}^{\infty}dx'\;\Phi^*(p)\int_{-\infty}^{\infty}dx\;\frac{1}{2\pi\hbar}\exp(-\frac{i}{\hbar}px)\,\delta(x-x')\int_{-\infty}^{\infty}dp'\,[\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial p'}\;\exp(\frac{i}{\hbar}p'\,x')]\,\Phi(p')$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} dp \int_{-\infty}^{\infty} dx' \, \Phi^*(p) \int_{-\infty}^{\infty} dx \, \frac{1}{2\pi\hbar} \exp(-\frac{i}{\hbar} px) \, \delta(x - x') \, \int_{-\infty}^{\infty} dp' \exp(\frac{i}{\hbar} p'x') [-\frac{\hbar}{i} \frac{d}{dp'} \, \Phi(p')]$$

맨 아래 단계에서 우리는 p' 적분에 대한 부분적분을 하였고, 이때 $\Phi(p' = \infty) = 0$ 을 적용하였다. 다시 위식을 x' 에 대해 적분하면 다음과 같이 쓸 수 있다.

$$< \hat{x} >_{\Psi} = \int_{-\infty}^{\infty} dp \, \Phi^*(p) \int_{-\infty}^{\infty} dp' \int_{-\infty}^{\infty} dx \, \frac{1}{2\pi\hbar} \exp(-\frac{i}{\hbar} px) \, \exp(\frac{i}{\hbar} p'x) [-\frac{\hbar}{i} \frac{d}{dp'} \, \Phi(p')]$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} dp \, \Phi^*(p) \int_{-\infty}^{\infty} dp' \int_{-\infty}^{\infty} dx \, \frac{1}{2\pi\hbar} \exp[\frac{i}{\hbar} x(p' - p)] \, [-\frac{\hbar}{i} \frac{d}{dp'} \, \Phi(p')]$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} dp \, \Phi^*(p) \int_{-\infty}^{\infty} dp' \, \delta(p' - p) \, [-\frac{\hbar}{i} \frac{d}{dp'} \, \Phi(p')]$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} dp \, \Phi^*(p) \, [-\frac{\hbar}{i} \frac{d}{dp} \, \Phi(p)]$$

이를 운동량 표현에서의 파동함수 $\Phi(p)$ 로 기댓값을 표시하면 다음과 같아야 하므로,

$$< \hat{x} >_{\Psi} := \int_{-\infty}^{\infty} dp \, \Phi^*(p) \, \hat{x} \, \Phi(p) \, ,$$

우리는 위치 연산자 $\hat{x}$ 의 운동량 표현은 $\hat{x} = -\frac{\hbar}{i} \frac{d}{dp}$ 가 되어야 함을 알 수 있다.